

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

离散统一气体动理学格式及其多尺度导热应用*

张创¹⁾ 郭照立^{2)†}

1) (杭州电子科技大学理学院, 能源研究所, 杭州 310018)

2) (华中科技大学数学与统计学院, 数学与应用学科交叉创新研究院, 武汉 430074)

(2025 年 5 月 28 日收到; 2025 年 6 月 9 日收到修改稿)

基于 Boltzmann 输运方程的数值模拟已成为研究多尺度粒子输运问题的一个有效方法, 但是该方程的非线性、多尺度、高维度等特征对数值方法的稳定性、相容性、计算效率/精度、渐近保持性质提出了巨大挑战. 近些年发展了诸多适用于任意克努森数的多尺度动理学方法, 离散统一气体动理学格式便是其中之一. 不同于传统直接数值插值格式, 离散统一气体动理学格式通过动理学方程在时间和位置空间上的特征解重构网格界面处的分布函数, 从而在一个数值时间步长尺度上耦合、累积和计算粒子输运和碰撞效应. 基于将物理方程演化信息融入到数值方法构造过程中的思想, 该方法的网格尺寸和时间步长不再受限于粒子平均自由程和弛豫时间, 能够自适应地高效模拟从弹道到扩散极限的多尺度粒子输运问题. 该方法基于有限体积法框架, 已经成功应用于微纳尺度流动传热、高超声速飞行器、固体材料导热导电、辐射、等离子体和湍流等领域. 本文主要针对该方法在多尺度热传导领域的发展进行综述及展望.

关键词: 多尺度粒子输运, Boltzmann 输运方程, 介观数值方法, 离散统一气体动理学格式, 热传导

PACS: 47.11.St, 05.20.Dd, 44.10.+i, 63.20.-e

DOI: 10.7498/aps.74.20250694

CSTR: 32037.14.aps.74.20250694

1 引言

多尺度粒子输运问题在精密制造、纳米材料、能源动力、国防军事等领域广泛存在^[1-7], 例如芯片散热过程中涉及固体材料中的电子输运、电声耦合、声子输运以及液冷微通道中的气液相变传热等, 尺寸从 10 nm 到 100 mm 量级, 横跨 7 个数量级^[1,3,7-11]; 航天器再入大气层过程中历经自由分子流、过渡流、滑移流和连续流, 涉及高温辐射、气体电离、烧蚀相变和湍流转捩等^[4,12-16]. 此类问题涉及大跨度的长度和时间尺度, 给物理建模与数值模拟带来了极大挑战^[2,14,17-21]. 一方面, 基于连续介质假设的宏观本构关系, 例如 Euler/Navier-Stokes 流动方程和 Fourier 导热定律, 计算效率高但难以

准确刻画微纳尺度或非平衡粒子输运过程^[4,14,22]; 另一方面, 第一性原理计算或分子动力学模拟等微观方法^[23-25], 精度高但是计算效率低, 难以满足工程实战需求. 因此如何实现高效高精度的跨尺度模拟成了诸多领域的一个前沿课题^[1-3,9,18,20,21].

一种常用的工程方法是宏观方程与经验系数的组合, 例如在固体材料导热领域, ANSYS, TCAD 和 COMSOL 等商业软件都采用等效 Fourier 导热模型^[1,9,26]:

$$\mathbf{q} = -\kappa_{\text{eff}} \nabla T, \quad (1)$$

其中等效热导率 κ_{eff} 为经验系数, 与材料种类、温度和尺寸等相关, 通过实验测量或第一性原理计算等方法得到. 商业软件封装了庞大的经验系数数据库可供用户选择. 相比于经典 Fourier 导热定律,

* 华中科技大学交叉研究支持计划 (批准号: 2023JCYJ002) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zlguo@hust.edu.cn

经验系数 κ_{eff} 的引入能更好地捕捉尺度效应、预测纳米晶体管峰值温升等^[1,27], 并且计算成本几乎不变. 但不足之处是默认热流与温度梯度的线性关系, 宏观热传导方程是个抛物线方程, 传播速度无穷大, 不符合物理规律^[28,29].

另一种方法是以 Boltzmann 输运方程 (Boltzmann transport equation, BTE) 为代表的介观动理学理论, 适用于气体分子、光子、中子、声子、等离子体和电子等载能粒子^[2,13,22,30-32]. 在介观动理学理论中, 克努森数 Kn 是关键参数, 定义为粒子平均自由程 λ 与系统特征长度 L_{ref} 的比值, 或者粒子弛豫时间 τ 与系统特征时间 t_{ref} 的比值, 其中相邻两次碰撞粒子所经过的平均长度是平均自由程, 所经历的平均时间是弛豫时间. BTE 通过捕捉粒子分布函数 $f = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{P})$ 在时间 t 、位置 $\mathbf{x}$ 和动量 $\mathbf{P}$ 空间的演化规律, 结合统计方法得到宏观量分布, 忽略了相干性, 要求系统特征长度远大于粒子相干长度, 其基本形式如下:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{P}} \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = \Omega_{\text{collision}}, \quad (2)$$

其中, 方程等号左端分别代表分布函数的时间演化项、迁移项和外力项, 右端是粒子碰撞项. BTE 在微观原子尺度与宏观连续介质尺度之间搭建了一座桥梁, 能够捕捉多尺度粒子输运过程: 一方面, 当克努森数趋于 0 时, 基于 Chapman-Enskog 等微扰展开理论^[33], BTE 能够恢复 Euler/Navier-Stokes 或 Fourier 等流动传热方程; 另一方面, BTE 的输入参数, 例如粒子碰撞截面、弛豫时间、色散关系和比热等, 可以通过微观方法计算得到^[23-25]. BTE 的碰撞项非常复杂, 通常采用粒子法、近似核或谱方法处理^[4,34,35]; 或者对其进行线性化处理, 并采用快速谱方法和特征值分解等方法求解^[35-38], 但计算资源成本依旧巨大. 在工程多尺度传热流动中通常采用简化的动理学模型^[22,30,35,39-42], 例如 Bhatnagar, Gross 和 Krook^[43] 提出的经典单弛豫时间 BGK 模型.

对于绝大多数问题, BTE 不存在解析解, 因此基于 BTE 的数值模拟已成为研究多尺度粒子输运问题的一个有效方法, 但是该方程的非线性、多尺度、高维度等特征对数值方法的稳定性、相容性、计算效率/精度、渐近保持性质提出了巨大挑战^[15,17-20,44,45].

一种求解 BTE 的方法是宏观矩方程或流体动

力学方程^[15,28,46,47]. 其核心思想是基于 BTE 的一阶、二阶或更高阶的微扰展开, 引入非线性、非局部、相位延迟或滞后等效效应, 超越 Euler/Navier-Stokes 流动方程或 Fourier 导热方程^[28,46,48,49]. 例如 1936 年, Burnett^[50] 基于分布函数的二阶近似得到热流与应力张量的表达式, 提出了 Burnett 方程; 1948 年, Cattaneo^[51] 在 Fourier 导热模型的基础上引入热流关于时间的一阶偏导数, 从而将温度扩散方程转变为双曲热传导方程, 弥补了无穷大热传播速度缺陷; 1949 年, Grad^[52] 将分布函数做 Hermite 多项式展开并保留到四阶, 得到了密度、速度、热流、能量, 以及对称应力张量的 13 个 BTE 矩方程, 即 Grad-13 矩方程; 1966 年, Guyer 和 Krumhansl^[37,53] 采用特征值分解的方法求解声子 BTE 中的正常散射核并推导了宏观 Guyer-Krumhansl 方程, 并预言了第二声和声子泊肃叶流动等现象; 1974 年 Hardy 和 Albers^[38] 采用特征值分解方法求解完整的声子 BTE 散射核, 推导了宏观导热方程; 2003 年, Struchtrup 和 Torrilhon^[54] 结合 Chapman-Enskog 展开理论和 Hermite 展开发展了 R13 方法……宏观矩方程结合滑移边界条件一定程度上可以捕捉非平衡效应, 但依旧局限于小克努森数, 并且随着宏观方程阶数变高, 稳定性和收敛性会变差^[13,15,46,47,55]. 除传统的微扰展开方法外, 数据驱动的 AI 多尺度建模方法近些年也备受关注^[56]. 例如 Han 等^[57] 在宏观 Euler 方程的基础上, 借助气体 BTE 的模拟数据, 采用数据驱动的机器学习方法训练非 Euler 部分的宏观通量, 进而学习出一个能够描述多尺度气体流动的宏观神经网络模型. Zhao 等^[58,59] 基于非平衡热力学理论和守恒耗散形式, 首先推导一个包含待定系数和未知函数的宏观热传导方程, 保证双曲特性和熵增准则, 然后借助声子 BTE 的模拟数据, 训练封闭该待定系数和函数, 构建一个能够描述多尺度声子导热的宏观方程. AI 多尺度建模方法目前尚处于发展阶段, 有待进一步完善.

另一种求解 BTE 的方法是采用介观数值方法, 但会引入数值误差 $o(\Delta t^a) + o(\Delta x^b) + o(\Delta P^c)$ ^[19,20,44], 其中 $(\Delta t, \Delta x, \Delta P)$ 和 (a, b, c) 分别代表时间、位置和动量空间的最小离散尺寸和精度. 一般而言, $(\Delta t, \Delta x, \Delta P)$ 越大, 计算效率越高; (a, b, c) 越大, 数值精度越高. 介观方法模拟多尺度粒子输运的能力主要取决于其在小克努森数下是否具备

渐近保持^[17]或统一保持性质^[19],即能否在 $\Delta t/\tau \gg 1$ 和 $\Delta x/\lambda \gg 1$ 的情况下准确捕捉宏观扩散或连续尺度的传热流动现象.

当前介观方法主要分为两大类,其一是以蒙特卡罗 (Monte Carlo, MC) 方法为代表的粒子类方法^[4]. MC 方法采用模拟粒子来替代真实粒子,采用算子分裂方法将粒子自由迁移和碰撞过程在一个数值时间步长内解耦,其中自由迁移部分采用拉格朗日方法准确追踪,而粒子碰撞过程则采用统计方法计算. MC 方法物理图像清晰,处理简单,能够应用到复杂几何外形、物理化学反应、多场耦合等问题,并且计算机内存需求低,维数灾难问题弱. 二十世纪六七十年代, Bird 采用 MC 方法成功模拟了高超声速钝体绕流稀薄气体动力学问题,做出了诸多杰出工作^[4,60]. 随后 MC 方法也被应用于求解声子 BTE^[61–65]. 但是由于 MC 方法解耦了粒子迁移与碰撞过程,因此其时间步长和网格尺寸需要小于弛豫时间和平均自由程,难以高效模拟小克努森数下的传热流动现象. 另外粒子类方法与生俱来的统计噪声极大地限制了其在低速、微流动、小温度差等小扰动问题中的数值精度. 为提高 MC 在小克努森数区域的计算效率,发展了隐式 MC^[66]、信息保存 MC^[14]、渐近保持 MC^[67]、统一气体动理学波粒方法^[68]和统一随机粒子^[69]等方法. 为减小统计噪声, Baker 和 Hadjiconstantinou^[70]发展了低噪声 MC 方法,仅考虑与平衡态的偏差. 结果表明该方法能够捕捉任意小的偏差,在玻尔兹曼碰撞积分的 MC 评估中能够节省大量资源,并且计算成本与偏差大小无关. 该方法早期应用于小马赫数下的微流动问题^[70],随后发展应用于小温度差的微纳尺度声子导热问题^[71],并不断完善或开源^[72,73]. 但是随着克努森数不断减小或趋于 0,低噪声 MC 方法计算效率会下降.

另一类介观方法是以离散坐标法 (discrete ordinate method, DOM) 为代表的确定性方法^[20,74–77],例如格子玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, LBM)^[78–80]、宏观-BTE 混合方法^[81–84]、离散统一气体动理学格式 (discrete unified gas kinetic scheme, DUGKS)^[76]、统一气体动理学格式 UGKS^[18,85,86]、合成迭代方法 (synthetic iterative scheme, SIS)^[20,87–89]等. 起源于格子气自动机^[90]的 LBM 采用均匀网格和有限的动量空间离散点来捕捉分布函数的演化规律^[78–80]. 该方法物理图像清晰,形式简单,已

被应用于各行各业^[30,91,92]. 由于该方法只采用了极少数动量空间离散点,因此当克努森数较大时,难以准确刻画复杂的粒子分布函数. 显格式 DOM 把动量空间离散成许多子空间,能够准确捕捉复杂的非平衡分布函数,但增大了计算机内存需求^[74,93]. 当离散子空间的数量不足时,会引起数值积分误差,降低数值守恒性或导致射线效应^[94,95]. 该方法在数值处理上将粒子自由迁移和碰撞效应解耦,所以时间步长要求小于粒子弛豫时间,并且在低克努森数时具有较大的数值耗散. 宏观-BTE 混合方法的特点是引入一个经验参数,即截止克努森数,并在不同的动量空间^[81,82]或位置空间^[83,84]上求解不同的物理方程. 具体而言,将动量空间或者位置空间划分成几个子区域,当子区域中的粒子输运接近自由分子流或弹道区域时,用 BTE 模拟;当子区域中的粒子输运接近连续流或扩散区域时,用宏观方程模拟. 该方法兼顾了 BTE 和宏观方程在各自尺度下的优势,提高了计算效率并且广泛应用于工程多尺度传热流动问题,但是合理的区域划分是个难题,并且截止克努森数一定程度上会影响计算精度. UGKS/DUGKS 是两种具备渐近保持或统一保持性质的动理学方法^[19],其核心是在一个数值时间步长内将粒子自由迁移与碰撞效应耦合. 当克努森数趋于 0 时,能够恢复离散状态下的宏观方程,并且数值时间步长和网格尺寸可以远大于粒子弛豫时间和平均自由程. UGKS 在过去 15 年中已成功应用于多尺度粒子输运问题^[18,85]. 该方法同时引入宏观控制方程和 BTE,并在有限体积法框架下进行求解,其中宏观通量通过网格界面处的分布函数求矩得到. UGKS 引入了 BTE 的形式积分来重构界面分布函数,从而在单个时间步长内实现粒子迁移与碰撞的耦合. 考虑到形式积分的数学表达式过于复杂,在 DUGKS 中,采用一种更简单的策略来重构界面通量,即沿粒子迁移的特征线方向求解 BTE,并采用中点规则处理界面通量的时间积分^[96]. 与 UGKS 相比, DUGKS 数学表达式更简单. 该方法已经成功应用于实际工程多尺度粒子输运问题^[76],如图 1 所示.

上述方法主要面向瞬态问题,时间步长取值有限. 针对稳态问题,发展隐格式或迭代法直接求解稳态 BTE 计算效率会更高^[20,27,87–89,108,109]. 一种经典的求解稳态 BTE 的方法是隐式 DOM 或源迭代^[20,94,110]. 该方法对粒子迁移项进行全隐式处理,

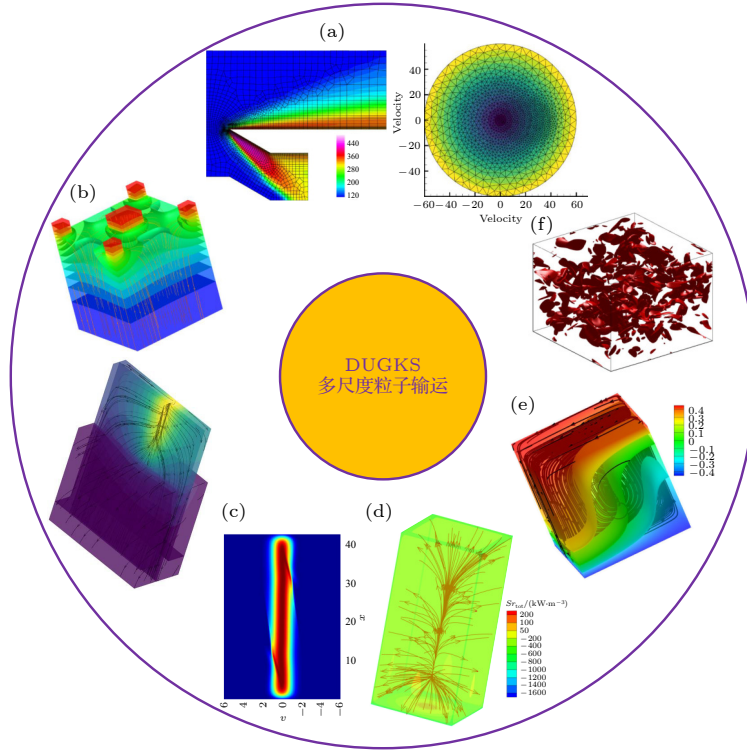


图1 DUGKS 在多尺度粒子输运领域的发展^[76], 涵盖气体分子^[96,97]、声子^[98]、电子^[99]、光子^[100]和等离子体^[101]等 (a) 稀薄高超声速流动^[102,103], 其中位置和动量空间均采用非结构网格离散; (b) 电子设备导热^[104,105]: 瞬态温度与热流分布; (c) 等离子体输运: 非平衡分布函数在位置和动量空间的分布; (d) 辐射输运^[100]; (e) 不可压低速渗流^[106]: 温度分布与速度流线; (f) 可压缩衰减湍流^[107]: 同一时刻, 涡量的模/涡量的均方根为 2 的等值面

Fig. 1. Development of DUGKS in the field of multiscale particle transport^[76] covers gas molecules^[96,97], phonons^[98], electrons^[99], photons^[100] and plasma^[101], etc: (a) Rarefied hypersonic flow^[102,103], where both position and momentum space are discretized using unstructured meshes; (b) thermal conduction in electronic devices^[104,105]: transient temperature and heat flux distribution; (c) plasma transport: distribution of nonequilibrium distribution functions in position and momentum space; (d) radiative transport^[100]; (e) incompressible low-speed seepage flow^[106]: temperature distribution and velocity streamlines; (f) compressible decaying turbulence^[107]: isosurfaces of the vorticity modulus/vorticity root mean square equals 2 at the same time.

对碰撞项进行半隐式处理. 给定一个初始宏观分布, 对于每个离散的动量, 该方法在整个位置空间迭代求解稳态 BTE, 然后遍历所有离散动量, 并通过粒子碰撞项的守恒约束, 例如质量、动量或能量守恒等, 更新得到下一迭代步的宏观量, 依次循环迭代直至收敛. 该方法在高克努森数时收敛较快, 但是当克努森数减小时, 收敛效率急剧下降甚至收敛到错误解^[20,88,110,111], 因此该方法并不适用于描述多尺度传热流动问题. 稳态 MC 方法的演化过程与隐式 DOM 类似^[65,112,113]. 给定一个 n -迭代步的宏观分布, 稳态 MC 方法追踪每个模拟粒子在几何位置空间的演化, 具体而言, 从边界出发追踪每个模拟粒子的运动轨迹直至被边界吸收, 然后统计每个粒子对局部宏观量的贡献, 更新 $(n+1)$ -迭代步的宏观量, 依次循环迭代直至收敛. 相比于瞬态 MC 方法, 稳态 MC 方法在高克努森数时能够极大地提高计算效率, 但是随着克努森数不断减

小, 其计算效率会下降并且统计噪声增大.

为提高隐式 DOM 在小克努森数区域的收敛效率, 耦合坐标法^[111]或全隐式动理学方法^[114]对粒子迁移项与碰撞项均采用全隐式处理, 将整个相空间的非平衡分布函数、平衡态分布和宏观量进行耦合迭代处理, 在任意克努森数都具有较高的收敛效率. 但是迭代求解六维离散相空间下的稳态 BTE 会产生庞大矩阵, 求解难度大, 难以应用于三维多尺度传热流动问题; 对于任意碰撞核, 该方法会变得非常复杂. 另一种非常成功的加速策略是合成迭代方法 SIS^[20,87,88]. 合成加速思想的核心是引入宏观方程或宏观算子来对 BTE 求解器做预处理. 宏观迭代对 BTE 迭代求解过程中的平衡态分布做预估修正, BTE 则给宏观方程提供宏观通量, 不同尺度的方程交替迭代并互相交换信息. 不同于混合方法, 在合成加速框架中宏观算子不影响最终收敛解, 收敛解完全由 BTE 控制. 合成加速思想

最早于二十世纪六七十年代提出, 为了快速求解中子 BTE [87,88], 后来不断发展并成功应用于辐射传热 [115] 和跨流域流动 [102,103,116–118] 等领域. Zhang 等 [27,89,119–121] 将合成加速思想引入到固体材料声子导热领域, 发展了快速求解稳态声子 BTE 的合成迭代方法, 目前已被 Hu 等 [122,123] 采用并开源. 合成加速方法在任意克努森数都具有极高的收敛效率, 并且在过去六十多年已成功应用于工程多尺度流动传热问题.

综上所述, 过去数十年发展了一系列求解 BTE 的介观数值方法, 涵盖中子、辐射、稀薄气体、声子、等离子体等领域. 不同介观方法因其数值建模过程的差异, 在不同的适用范围或时空尺度上展现其各自的优越性 [2,18,20,21,30,66,76,115,121,124], 如图 2 所

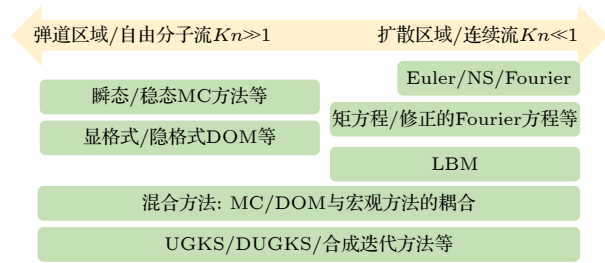


图 2 不同介观方法因其数值建模过程的差异, 在不同的适用范围或时空尺度上展现其各自的优越性 [2,18,20,30,66,76,115,121,124]

Fig. 2. Different mesoscopic methods demonstrate their respective advantages in different scopes of application or spatiotemporal scales due to differences in their numerical modeling processes [2,18,20,30,66,76,115,121,124].

示, 其中 DUGKS 因其独特数值建模思想在多尺度粒子输运领域展现巨大潜力 [76]. 本文主要针对该方法在多尺度热传导领域的发展进行综述及展望. 第 2 节介绍 DUGKS 求解声子 BTE 的基本演化过程; 第 3 节介绍 DUGKS 在声子导热领域的方法拓展以及声子流体动力学导热研究; 第 4 节给出总结与展望.

2 离散统一气体动理学格式 DUGKS

在固体材料热传导中, 声子是主要的载能粒子 [31]. 本节以声子 Boltzmann 输运方程单弛豫时间模型 (RTA-BTE) 为例介绍 DUGKS 的数值建模思想. 前期研究通常采用各向同性假设或引入比热对声子平衡态分布作线性化近似 [84,89,119,122,123], 如图 3 所示. 对于常温硅锗等半导体材料, 声子物性参数在不同动量方向上的差异较小 [27,45,121], 因此可以对其动量空间作各向同性近似处理; 但是对于石墨等层状材料 [125–127], 面内 in-plane 方向和面外 out-of-plane 方向的热导率相差 1—2 个数量级, 是典型的各向异性材料, 不能采用各向同性近似处理. 为不失一般性, 本节采用各向异性的动量空间和非线性的平衡态分布. RTA-BTE 模型方程如下:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla g = \frac{g^{\text{eq}}(T_{\text{pseudo}}) - g}{\tau(T)} + \dot{S}, \quad (3)$$

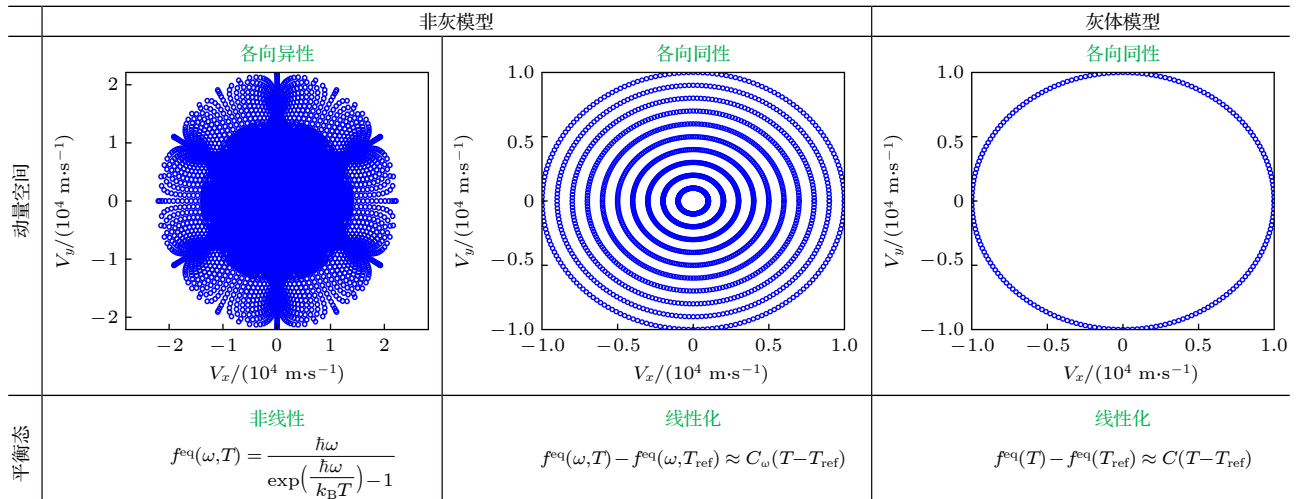


图 3 常用的声子 BTE 模型或近似处理 [29,41,47,123,126], 非灰与灰体模型的区别在于是否考虑声子色散关系或频率依赖特性, 动量空间: 各向异性或各向同性; 平衡态分布: 采用非线性的 Bose-Einstein 平衡态分布或引入比热作线性化近似处理

Fig. 3. Commonly used phonon BTE models or approximations [29,41,47,123,126], the difference between non-gray and gray models lies in whether the phonon dispersion relation or frequency dependence is considered. Momentum space: anisotropic or isotropic; equilibrium distribution: using nonlinear Bose-Einstein equilibrium distribution or introducing specific heat for linear approximation.

$$g^{\text{eq}}(T) = \hbar\omega \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}, \quad (4)$$

其中 g 是声子能量密度分布函数, g^{eq} 是平衡态分布. 弛豫时间 τ 和群速度 $\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{K}}\omega$ 均与声子分支 p 、动量 $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{K}$ 或能量 $\hbar\omega$ 相关, 由材料种类、温度和尺寸等因素决定, 可以通过第一性原理计算、实验测量或经验公式得到, 其中 ω 是角频率, $\mathbf{K}$ 是倒格矢, $\hbar = h/(2\pi)$, h 是普朗克常数, k_B 是 Boltzmann 常数. $\dot{S}$ 是声子从外界吸收的能量. 声子散射过程满足能量守恒, 可分为满足动量守恒的 N 散射过程和不满足动量守恒的 R 散射过程^[31]. RTA-BTE 模型假设所有声子散射均是 R 过程. 宏观物理量, 例如局部能量密度 U 和热流密度 $\mathbf{q}$ 等, 通过声子分布函数求矩得到:

$$U = \sum_p \int g d\mathbf{K}, \quad (5)$$

$$\mathbf{q} = \sum_p \int \mathbf{v} g d\mathbf{K}, \quad (6)$$

其中 $d\mathbf{K}$ 是对整个第一布里渊区的积分. 当系统处于非平衡状态时, 热力学温度没有明确的定义, 因此通过如下约束定义等效平衡温度^[22,32]:

$$\sum_p \int g^{\text{eq}}(T) d\mathbf{K} = \sum_p \int g d\mathbf{K}. \quad (7)$$

引入虚假温度用以保证声子散射项满足能量守恒^[22,64,128,129],

$$\sum_p \int \frac{g^{\text{eq}}(T_{\text{pseudo}}) - g}{\tau(T)} d\mathbf{K} = 0. \quad (8)$$

当 τ 是常数时, $T_{\text{pseudo}} = T$; 否则不等. 通过牛顿迭代法求解上述两个非线性方程 (7) 和 (8) 分别得到等效平衡温度和虚假温度.

以常温硅材料为例, 其内部不同频率的声子平均自由程横跨多个数量级, 从几纳米到数十微米^[121], 如图 4 所示. 换言之, 当材料尺寸固定时, 克努森数横跨多个数量级, 是个多尺度热传导过程. 当 $Kn \gg 1$, 声子平均自由程远大于系统特征长度, 声子弹道运输主导传热; 当 $Kn \ll 1$, 声子平均自由程远小于系统特征长度, 声子扩散运输主导传热. 在扩散极限下 $Kn \rightarrow 0$, 基于一阶 Chapman-Enskog 展开, 方程 (3) 能够恢复宏观 Fourier 导热方程^[19,98].

DUGKS 基于有限体积法框架数值求解 BTE, 将七维相空间全部离散^[19,76,96,98,130]. 离散状态下的 RTA-BTE 形式如下:

$$g_{i,k}^{n+1} - g_{i,k}^n + \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{j \in N(i)} \left(\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n}_{ij} g_{ij,k}^{n+1/2} S_{ij} \right) = \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{g_{i,k}^{\text{eq},n+1} - g_{i,k}^{n+1}}{\tau_{i,k}^{n+1}} + \dot{S}_{i,k}^{n+1} + \frac{g_{i,k}^{\text{eq},n} - g_{i,k}^n}{\tau_{i,k}^n} + \dot{S}_{i,k}^n \right), \quad (9)$$

其中 $g_{i,k}^n = g(t_n, \mathbf{x}_i, \mathbf{P}_k)$, 其余同理. V_i 是控制体 i 的体积, $N(i)$ 是所有与控制体 i 相邻的控制体 j 集合 (图 5), ij 是控制体 i 与控制体 j 的交界面, S_{ij} 是该交界面的面积, $\mathbf{n}_{ij}$ 是该交界面的单位法向矢量, 方向由控制体 i 指向控制体 j , $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ 是时间步长. 在方程 (3) 从 t_n 时刻到 t_{n+1} 时刻的时间积分上, 方程 (9) 采用中点积分规则处理声子迁移项, 采用梯形积分规则处理声子散射项和热源项. 引入两个辅助分布函数并定义为

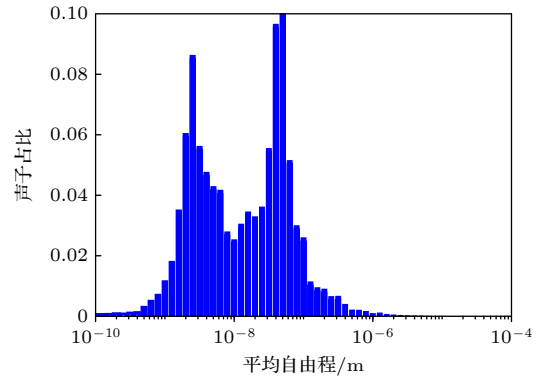


图 4 常温下硅材料中不同平均自由程的声子模式占比, 其中声子物性参数由第一性原理计算得到^[123]

Fig. 4. The proportion of phonon modes with different mean free paths in silicon materials at room temperature, where the phonon physical properties are obtained by first-principles calculations^[123].

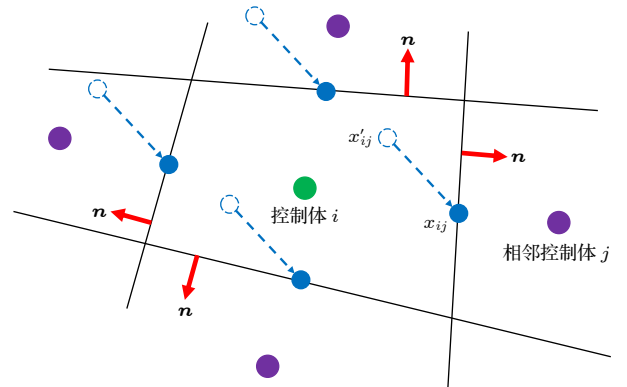


图 5 有限体积框架下 DUGKS 沿着特征线方向重构网格界面处的分布函数^[21,78,98,100,131]

Fig. 5. DUGKS reconstructs the distribution function along the characteristic line direction at the cell interface in the finite volume framework^[21,78,98,100,131].

$$\tilde{g} = g - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{g^{\text{eq}} - g}{\tau} + \dot{S} \right), \quad (10)$$

$$\tilde{g}^+ = g + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{g^{\text{eq}} - g}{\tau} + \dot{S} \right). \quad (11)$$

方程 (9) 转变为

$$\tilde{g}_{i,k}^{n+1} - \tilde{g}_{i,k}^{+,n} + \frac{\Delta t}{V_i} \sum_{j \in N(i)} (\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{n}_{ij} g_{ij,k}^{n+1/2} S_{ij}) = 0. \quad (12)$$

通过方程 (12) 可得, 在 DUGKS 数值演化过程中需要计算中间时刻网格界面处的分布函数 $g_{ij,k}^{n+1/2}$ 和下一时刻网格中心处的分布函数 $g_{i,k}^{n+1}$.

首先计算中间时刻网格界面处的分布函数 $g_{ij,k}^{n+1/2}$, 细节如下. 不同于传统直接数值插值格式, DUGKS 通过动理学方程在时间和位置空间上的特征解重构网格单元界面处的分布函数. 对方程 (3) 从 t_n 到 $t_{n+1/2} = t_n + \Delta t/2$ 沿特征线积分, 其中 $\mathbf{x}_{ij}$ 位于控制体 i 和控制体 j 交界面 ij 的中心 (图 5):

$$\begin{aligned} & g_k^{n+1/2}(\mathbf{x}_{ij}) - g_k^n(\mathbf{x}'_{ij}) \\ &= \frac{\Delta t}{4} \left[\left(\frac{g_k^{\text{eq},n+1/2} - g_k^{n+1/2}}{\tau_k^{n+1/2}} + \dot{S}_k^{n+1/2} \right) \right]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{ij}} \\ &+ \left(\frac{g_k^{\text{eq},n} - g_k^n}{\tau_k^n} + \dot{S}_k^n \right) \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}'_{ij}}, \end{aligned} \quad (13)$$

式中, $\mathbf{x}'_{ij} = \mathbf{x}_{ij} - \mathbf{v}_k \Delta t/2$. 方程 (13) 转变为

$$\bar{g}_k^{n+1/2}(\mathbf{x}_{ij}) - \bar{g}_k^{+,n}(\mathbf{x}'_{ij}) = 0, \quad (14)$$

$$\bar{g} = g - \frac{\Delta t}{4} \left(\frac{g^{\text{eq}} - g}{\tau} + \dot{S} \right), \quad (15)$$

$$\bar{g}^+ = g + \frac{\Delta t}{4} \left(\frac{g^{\text{eq}} - g}{\tau} + \dot{S} \right). \quad (16)$$

方程 (14) 中的 $\bar{g}_k^{+,n}(\mathbf{x}'_{ij})$ 通过数值插值得到:

$$\bar{g}_k^{+,n}(\mathbf{x}'_{ij}) = \bar{g}_k^{+,n}(\mathbf{x}_c) + (\mathbf{x}'_{ij} - \mathbf{x}_c) \boldsymbol{\sigma}_c, \quad (17)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}_c$ 是分布函数 $\bar{g}_k^{+,n}(\mathbf{x}_c)$ 在位置空间的散度, 可以通过迎风格式、van Leer 限制器、最小二乘法等数值计算方法得到. $\mathbf{x}_c$ 通过迎风特性选取为界面两侧的网格中心 $\mathbf{x}_i$ 或 $\mathbf{x}_j$, 或者采用中心差分格式选取为界面中心 $\mathbf{x}_{ij}$. 联立方程 (14), (16), (17) 计算得到中间时刻网格界面处分布函数 $\bar{g}_k^{n+1/2}(\mathbf{x}_{ij})$. 因为声子散射项满足能量守恒, 所以:

$$\begin{aligned} & \sum_p \int g^{\text{eq}}(T_{ij}^{n+1/2}) d\mathbf{K} \\ &= \sum_p \int \left(\bar{g}_{ij,k}^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{4} \dot{S}_{ij}^{n+1/2} \right) d\mathbf{K}. \end{aligned} \quad (18)$$

对方程 (15) 进行变换:

$$\frac{\bar{g} + \frac{\Delta t}{4} \dot{S} - g^{\text{eq}}}{4\tau + \Delta t} = \frac{g^{\text{eq}} - g}{4\tau}. \quad (19)$$

结合声子散射项满足能量守恒的约束:

$$\sum_p \int \frac{\bar{g}_k + \frac{\Delta t}{4} \dot{S}_k - g_k^{\text{eq}}}{4\tau_k + \Delta t} d\mathbf{K} = \sum_p \int \frac{g_k^{\text{eq}} - g_k}{4\tau_k} d\mathbf{K} = 0. \quad (20)$$

$$\begin{aligned} & \Rightarrow \sum_p \int \frac{g_k^{\text{eq}}(T_{ij,\text{pseudo}}^{n+1/2})}{4\tau_k(T_{ij}^{n+1/2}) + \Delta t} d\mathbf{K} \\ &= \sum_p \int \frac{\bar{g}_{ij,k}^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{4} \dot{S}_{ij,k}}{4\tau_k(T_{ij}^{n+1/2}) + \Delta t} d\mathbf{K}. \end{aligned} \quad (21)$$

通过迭代法依次求解方程 (18) 和方程 (21) 计算得到中间时刻网格界面处的等效平衡温度和虚假温度, 接着通过方程 (15) 计算得到中间时刻网格界面处的声子分布函数 $g_{k,ij}^{n+1/2}$.

其次更新下一时刻网格中心处的声子分布函数, 细节如下. 当 $g_{ij,k}^{n+1/2}$ 和 $g_{ij,k}^{\text{eq},n+1/2}$ 已知, 通过方程 (12) 更新 $\tilde{g}_{i,k}^{n+1}$. 因为声子散射项满足能量守恒, 所以:

$$\sum_p \int g^{\text{eq}}(T_i^{n+1}) d\mathbf{K} = \sum_p \int \tilde{g}_{i,k}^{n+1} d\mathbf{K}. \quad (22)$$

对方程 (10) 进行变换:

$$\frac{\bar{g} + \frac{\Delta t}{2} \dot{S} - g^{\text{eq}}}{2\tau + \Delta t} = \frac{g^{\text{eq}} - g}{2\tau}. \quad (23)$$

结合声子散射项满足能量守恒的约束:

$$\sum_p \int \frac{\tilde{g}_k + \frac{\Delta t}{2} \dot{S}_k - g_k^{\text{eq}}}{2\tau_k + \Delta t} d\mathbf{K} = \sum_p \int \frac{g_k^{\text{eq}} - g_k}{2\tau_k} d\mathbf{K} = 0. \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & \Rightarrow \sum_p \int \frac{g_k^{\text{eq}}(T_{i,\text{pseudo}}^{n+1})}{2\tau_k(T_i^{n+1}) + \Delta t} d\mathbf{K} \\ &= \sum_p \int \frac{\tilde{g}_{i,k} + \frac{\Delta t}{2} \dot{S}_{i,k}}{2\tau_k(T_i^{n+1}) + \Delta t} d\mathbf{K}. \end{aligned} \quad (25)$$

通过迭代法依次求解方程 (22) 和方程 (25) 计算得到下一时刻网格中心处的等效平衡温度和虚假温度, 接着通过方程 (10) 计算得到下一时刻网格中心处的声子分布函数 $g_{k,i}^{n+1}$. 最后通过声子分布函数求矩更新下一时刻的宏观量.

以上是 DUGKS 的主要数值求解过程, 更多细节可以参考文献 [76,96,98]. DUGKS 于 2013 年提出 [96], 于 2017 年在 GitHub 正式发布开源程序包 dugksFoam [130]. 截至目前, DUGKS 已被国内外团队采用并成功应用于微纳尺度流动传热、高超声速飞行器、湍流、固体材料导热导电、中子、辐射、等离子体等领域 [76,96,97,132,133], 基本模拟流程如图 6 所示. 下面简要总结下该方法的特点: 1) DUGKS 核心在于在重构界面分布函数时, 沿着粒子动量的特征线方向又求解了一次 BTE, 从而在一个数值时间步长尺度上耦合、累积和计算粒子输运和碰撞效应, 没有像经典的蒙特卡罗方法或离散坐标法一

样将粒子迁移与碰撞完全解耦, 因此其网格尺寸和时间步长不再受限于粒子平均自由程和弛豫时间, 能够自适应地模拟多尺度粒子输运问题; 2) 采用有限体积法框架离散由时间、位置和动量构成的七维相空间. 鉴于有限体积法特点, 其能处理复杂几何结构外形, 采用任意的动量空间离散和积分规则, 引入位置/动量空间非结构和自适应加密等技术等, 不受限于马赫数和克努森数. 但是这也导致其存在维数灾难问题, 计算机内存需求、计算时间等会随问题复杂程度和计算规模的增大而增大.

3 DUGKS 多尺度导热应用

3.1 方法拓展与导热应用

DUGKS 作为一种数值离散求解 Boltzmann 模型方程的动理学格式, 于 2016 年从稀薄气体流动拓展至固体材料导热领域, 数值求解声子 RTA-BTE 灰体模型 [98]. 该模型数学形式与气体 BGK 模型方程相同, 其中比热 C 、弛豫时间 τ 和群速度 $|v|$ 均是常数. 基于 Chapman-Enskog 展开和渐近保持分析等数学理论, 前期工作证明了 DUGKS 具有渐近保持或统一保持性质 [19]. DUGKS 在弹道极限下等价于无碰撞动理学方程的 Lax-Wendroff 离散形式, 在扩散极限下能自动恢复到有限体积法离散下的宏观扩散方程. 通过模拟从弹道到扩散极限下的稳态和非稳态热传导问题, 该方法的数学性质得到了验证, 并且数值时间步长和网格尺寸不再受限于弛豫时间和平均自由程. 例如采用 DUGKS 模拟了准一维非均匀薄膜的多尺度瞬态导热问题, 克努森数随着空间位置从 10^{-4} 变化至 10. 数值结果表明即使采用粗网格和较大的时间步长, DUGKS 也能成功捕捉到多尺度瞬态导热特性. 而 DOM 无法捕捉到这些瞬态导热特性, 除非采用非常细的网格和很小的时间步长. 为准确模拟同一时刻下的瞬态导热特性, DUGKS 需要 0.79 s 而二阶迎风 DOM 需要 47.88 s [98]. 因此对于此类多尺度瞬态导热问题, DUGKS 计算效率远高于 DOM.

不同于灰体模型, 第一性原理计算或非灰模型考虑了声子分支和非线性色散关系, 其中不同频率的声子具有不同的比热、弛豫时间、群速度和克努森数, 彼此相互耦合. 从数学形式上看, BTE 非灰模型方程可以理解为联立求解多个具有不同克努森数或输入参数的 BTE 灰体模型, 因此从灰体拓展

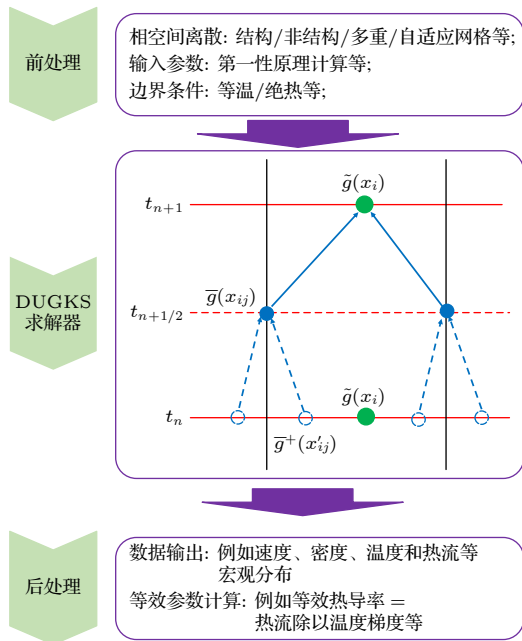


图 6 多尺度粒子输运模拟流程 [102,118,130–133], 即前处理-DUGKS 求解器-后处理. 前处理: 动量空间和位置空间均可采用结构/非结构/自适应网格等, 输入参数——弛豫时间和色散关系等, 可以通过第一性原理计算、实验或经验公式等方式获取; DUGKS 求解器: 分布函数在时间和位置空间的演化过程; 后处理: 通过分布函数求矩得到宏观量并计算相关等效参数, 不局限于经典的宏观本构关系

Fig. 6. Multiscale particle transport simulation process [102,118,130–133]: Pre-processing-DUGKS solver-post-processing. Pre-processing: Both momentum space and position space can use structured/unstructured/adaptive meshes, etc. Input parameters such as relaxation time and dispersion relations can be obtained through first-principles calculations, experiments, or empirical formulas; DUGKS solver: The evolution of the distribution function in time and position space; Post-processing: Macroscopic quantities are obtained by taking the moments of the distribution function and calculating related effective parameters, not limited to classical macroscopic constitutive relations.

到非灰模型, DUGKS 在数值建模上不存在难度. 2017 年, Luo 等^[134] 将 DUGKS 从灰体模型拓展到非灰模型, 假设系统温升很小并且采用了线性化的声子平衡态分布. 数值结果表明 DUGKS 能够较好地预测数十纳米到数百微米的常温硅材料的热导率, 并与实验数据保持一致. 2019 年, Zhang 等^[129] 将 DUGKS 拓展至大温度差系统, 其中弛豫时间与声子频率相关并且随着不同位置处温度的变化而改变. 采用非线性的 Bose-Einstein 平衡态分布并通过牛顿迭代法处理平衡态分布与温度的非线性关系. 数值结果表明 DUGKS 能够准确预测多尺度导热特性, 在低温弹道极限下与 Stefan-Boltzmann 解析解保持一致, 在扩散极限下恢复 Fourier 导热方程, 其中热导率随着空间位置变化. 上述工作都采用动量空间各向同性假设. 为摒弃该假设, 采用第一性原理计算得到锗材料的声子色散关系与弛豫时间, 并将其直接导入 DUGKS 求解器^[135]. 针对准一维频域热反射结构, 数值结果表明 DUGKS 能够准确预测不同加热频率下温度与热源的相位差.

除单弛豫时间模型外, DUGKS 也被拓展至双弛豫时间模型和电声耦合动理学模型. 2019 年, Luo 等^[136] 采用 DUGKS 数值离散求解声子双弛豫时间 Callaway 模型:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla g = \frac{g_{\text{N}}^{\text{eq}} - g}{\tau_{\text{N}}} + \frac{g_{\text{R}}^{\text{eq}} - g}{\tau_{\text{R}}}, \quad (26)$$

$$g_{\text{R}}^{\text{eq}} = C_{\omega}(T - T_{\text{ref}}),$$

$$g_{\text{N}}^{\text{eq}} = C_{\omega}(T - T_{\text{ref}}) + C_{\omega}T \frac{\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}}{\omega}, \quad (27)$$

其中 τ_{N} 和 τ_{R} 分别是声子-声子散射过程中满足动量守恒的 N 散射过程和满足动量守恒的 R 散射过程的弛豫时间. g_{N}^{eq} 和 g_{R}^{eq} 是 N 过程和 R 过程的线性化平衡态分布, $\mathbf{u}$ 是宏观漂移速度, T_{ref} 是参考温度. 数值结果表明, DUGKS 能够准确预测石墨烯材料中不同 R 过程或 N 过程散射强度下的声子多尺度导热特性. 2024 年, Lian 等^[99] 采用 DUGKS 数值离散求解电子双弛豫时间 Callaway 模型, 其数学形式与声子 Callaway 模型几乎一样. 不同之处是采用了非线性 Fermi-Dirac 平衡态分布, 并用牛顿迭代法处理平衡态分布与温度、化学势之间的关系. 数值结果表明 DUGKS 能够准确捕捉金和石墨烯等半导体材料中的尺寸效应、电子流体动力学特性和热电效应. 同年 Zhang 等^[137] 采

用 DUGKS 数值离散求解耦合电子和声子输运的动理学方程, 其中电子和声子温度不同. 数值结果表明 DUGKS 能够预测金属材料中的电声耦合现象, 与时域热反射实验的结果符合, 并且其时间步长不受限于弛豫时间.

除方法拓展外, DUGKS 也被应用于三维热点系统瞬态热传导问题, 如图 1(b) 所示. 2022 年 Zhang 等^[104] 采用 DUGKS 模拟了热点系统中热源间距与散热效率的关系. 数值结果表明, 散热效率与热源间距相关. 随着纳米热源间距的减小, 瞬态散热速率先增大再减小. 当纳米热源间距与声子平均自由程相当时, 散热速率最大. 2025 年, Zhang 等^[105] 采用 DUGKS 模拟了三维 Silicon-on-insulator 和 Bulk 鳍式场效应晶体管 FinFET 瞬态散热问题, 研究了持续加热、间歇性加热、交替加热 3 种加热方式对纳米晶体管微纳尺度瞬态导热的影响. 数值结果表明在 Bulk 和 SOI FinFET 中, 交替加热的峰值温升分别比持续加热低 28% 和 43.5%. 将 RTA-BTE 与 COMSOL/TCAD 等商业软件中常用的等效 Fourier 导热模型进行了对比. 结果表明通过引入经验系数, 等效 Fourier 导热模型能够更好地预测峰值温升. 但是在纳米尺寸的热源和几何边界转角区域附近, 因为声子弹道效应的存在, 等效 Fourier 导热模型与 RTA-BTE 结果存在较大偏差.

3.2 热涡、声子湍流与热波涟漪

当系统中 N 散射过程强于边界散射且 R 散射过程弱于边界散射时, 声子流体动力学现象会出现, 即固体材料中的热传导行为类似流体流动, 例如第二声和声子泊肃叶流动等, 违反经典的宏观 Fourier 导热定律^[37,47,53,126,127,138,139]. 截至目前, 第二声或声子泊肃叶流动现象主要在极低温环境的 NaF 等三维材料, 或者 100 K 左右的石墨烯、石墨等具有高热导率的碳基材料中会出现. 在上述材料中, N 散射过程对导热的贡献不能忽略^[6,127,138-140]. 本节主要探讨能否在固体材料中发现其他声子流体动力学现象^[125,126,141,142], 并比较其与经典流体力学的差异.

热涡——2019 年 Zhang 等^[119] 基于 RTA-BTE 模拟发现在纳米尺寸周期阵列排布的多孔硅结构中, 热流在孔的前缘和尾缘分别会形成一个回路: 从低温区域流向高温区域, 再从高温区域流回低温区域, 违反 Fourier 导热定律. 2024 年 Tur-Prats

等^[143]基于 MC 方法和宏观非 Fourier 导热方程在纳米硅材料中理论预测了类似现象. 2022 年 Shang 等^[144]采用 Chapman-Enskog 展开方法, 基于声子 Callaway 模型推导了适用于二维材料导热的声子流体动力学方程. 理论和数值结果表明该现象, 即热流在几何位置空间形成一个回路, 在声子流体动力学区域会出现, 在扩散区域消失, 如图 7(a), (b) 所示. 类似现象也被国内外团队在二维和三维材料中理论发现^[145,146]. 为进一步研究该非 Fourier 导热现象, 2021 年, Zhang 等^[141]基于 DUGKS 数值模拟了不同克努森数、材料尺寸或温度下的热传导特性. 数值结果表明该现象在扩散区域消失, 在弹道和声子流体动力学区域会出现.

鉴于涡旋或涡的定义和识别是一个困扰百年且存在争议的问题^[147], 截至目前难以从数学角度严格证明涡的存在. 本文将热涡 (heat vortices) 定义为热流旋度^[141], 证明该现象在扩散区域不存在, 细节如下. 考虑系统内部任意一条不包含几何边界的闭合曲线 l , 则热流旋度:

$$\oint_l \mathbf{q} \cdot d\mathbf{r} = -\kappa \oint_l \frac{dT}{dr} \cdot d\mathbf{r} = 0, \quad (28)$$

其中热导率 κ 是常数, $d\mathbf{r}$ 是闭合曲线顺时针方向的单位切向量. 方程 (28) 表明系统内部任意闭合曲线的热流旋度恒为零, 即热涡在扩散区域消失. 通过比较不可压 Navier-Stokes 方程和声子流体动力学 Guyer-Krumhansl 方程^[37,47,53]:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{U} + \frac{\nabla p}{\rho} = \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{U}, \quad (29)$$

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\mathbf{q} + \kappa \nabla T}{\tau_R} = \frac{1}{5} |\mathbf{v}|^2 \tau_N (\nabla^2 \mathbf{q} + 2\nabla(\nabla \cdot \mathbf{q})). \quad (30)$$

结果发现两个方程均存在黏性项, 即速度的二阶空间散度 $\nabla^2 \mathbf{U}$ 和热流的二阶空间散度 $\nabla^2 \mathbf{q}$. 借鉴流体力学理论, 该黏性项对声子泊肃叶流动或热涡现象的产生起到了关键作用^[141].

声子湍流——在流体力学 Navier-Stokes 方程中, 对流项 $(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{U}$ 对湍流的产生至关重要, 但是在 Guyer-Krumhansl 方程 (30) 中, 对流项 $(\nabla \cdot \mathbf{q})\mathbf{q}$ 不存在, 或者在低阶展开项中不存在^[141]. Guyer-Krumhansl 方程近似低雷诺数流动 Stokes 方程. 2023 年, Sýkora 等^[148]基于非平衡热力学理论和动理学方程的一阶 Chapman-Enskog 展开推导得到了一个宏观流体动力学方程. 不同于 Guyer-Krumhansl 方程 (30), 该方程包含了热流的对流项 $(\nabla \cdot \mathbf{q})\mathbf{q}$ ^[148], 并理论预言了卡门涡街现象在雷诺数等于 150 时会出现. 但是 2018 年, Huberman^[126]预估常温石墨烯材料的雷诺数在 1 左右, 实际材料中可能难以实现高雷诺数. 截至目前, 关于声子湍流的理论结果依旧存在争议与不确定性, 没有实验报道.

热波涟漪——当材料与环境达到热平衡后, 对其施加高温热源, 其温度会上升, 接着移除热源后, 温度会逐渐下降, 并最终与环境达到热平衡. 该现象在日常生活中普遍存在. 在降温阶段, 瞬态温度不会低于环境温度或初始最低温度, 遵循 Fourier

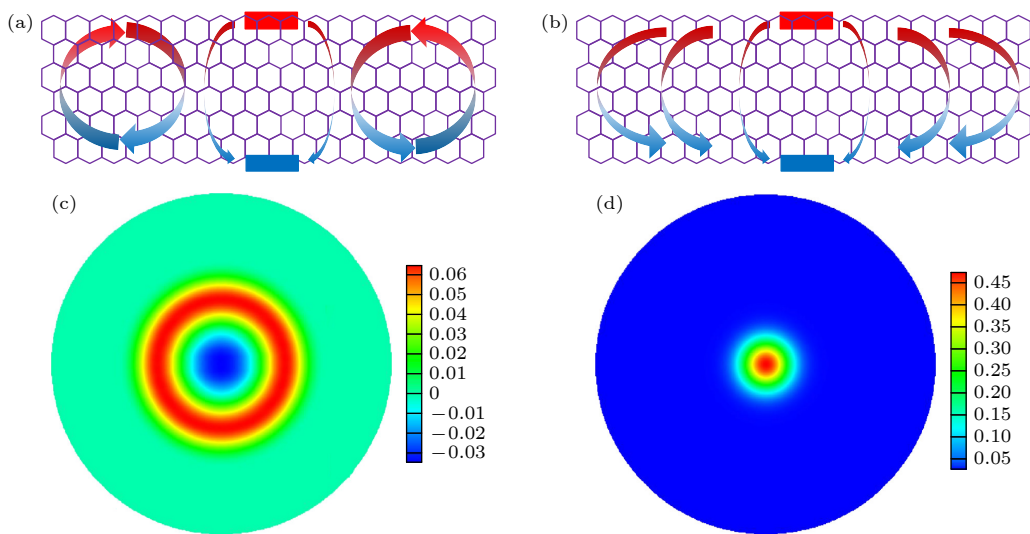


图 7 (a), (c) 声子流体动力学导热: 热涡^[141,144]与热波涟漪^[125,149,150]; (b), (d) Fourier 导热

Fig. 7. (a), (c) Phonon hydrodynamic heat conduction: thermal vortices^[141,144] and thermal wave ripples^[125,149,150]; (b), (d) Fourier heat conduction.

导热定律. 然而 2021 年, Zhang 等^[149] 通过 DUGKS 数值求解 Callaway 模型, 模拟了不同声子散射强度下的瞬态导热特性. 结果发现当 N 过程较强且 R 过程较弱时, 材料在降温阶段会出现瞬态温度低于环境温度的反常导热现象. 类比一滴水滴在水平面上泛起涟漪, 这是高温热源在环境温度下产生了热波涟漪. 该现象在弹道和扩散区域消失, 在声子流体动力学区域会出现; 在准一维系统中消失, 在准二维或三维系统中出现, 如图 7(c), (d) 所示. 该现象在同一时间段被 Jeong 等^[125] 实验发现, 但是截至目前, 只有一篇实验报道, 并且该现象在弹道区域消失的理论结果缺乏实验验证.

从宏观导热方程的双曲特性和声子自由迁移的角度解释该现象. 宏观 Fourier 导热模型是个抛物线方程, 热传播速度无穷大, 不符合物理规律^[28]. 鉴于热力学第二定律和有限声子群速度, 宏观热传播速度是个有限值, 则宏观导热方程需要满足双曲特性^[28,29], 即存在温度波动项:

$$c_1 \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + c_2 \frac{\partial T}{\partial t} + c_3 \nabla_{\mathbf{x}}^2 T = c_4, \quad (31)$$

其中 c_1 , c_2 和 c_3 是系数, c_4 是关于温度和热流的泛函. 考虑声子流体动力学极限和扩散极限状态: 当系统中只存在 N 过程且 N 过程非常强时, 声子-声子散射满足动量守恒, 其对应的宏观导热方程趋于波动方程 $c_2 = 0$; 当系统中只存在 R 过程且 R 过程非常强时, 声子-声子散射不满足动量守恒, 其对应的宏观导热方程趋于扩散方程 $c_1 = 0$. 实际导热系统介于两者之间, 当双曲导热方程 (31) 中的波动项占主导时, 鉴于波动方程的解析解, 热波涟漪现象会出现并且只在准二维或三维体系中会出现^[149]. 在弹道极限时, 声子在系统内部自由迁移, 不发生散射, 其分布函数满足:

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{P}, t) = g(\mathbf{x} - \mathbf{v}\delta t, \mathbf{P}, t - \delta t), \quad (32)$$

其中 δt 是任意一段时间步长. 根据方程 (5), 特定位置特定时刻的局部能量是此时此刻所有声子的统计平均:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{x}, t) &= \sum_p \int g(\mathbf{x}, \mathbf{P}, t) d\mathbf{K} \\ &= \sum_p \int g(\mathbf{x} - \mathbf{v}(t - t_h), \mathbf{P}, t_h) d\mathbf{K} \\ &\geq \sum_p \int g(\mathbf{x} - \mathbf{v}t, \mathbf{P}, 0) d\mathbf{K} = U(\mathbf{x} - \mathbf{v}t, 0), \end{aligned} \quad (33)$$

其中 $t = t_h$ 和 $t = 0$ 分别代表高温热源撤去时刻和加载热源前的初始时刻. 因为加载高温热源会让局部能量增大, 所以存在不等号. 根据方程 (7), 能量越大, 温度越高. 综上所述, 瞬态温度在弹道极限时不会低于初始最低温度或环境温度.

4 总结与展望

作为一种数值离散求解 Boltzmann 模型方程的动理学格式, DUGKS 因其独特数值建模思想在多尺度粒子输运领域展现巨大潜力. 其核心是将物理方程演化信息融入到数值方法建模过程中, 代替常规的直接数值插值. 具体而言, DUGKS 通过动理学方程在时间和位置空间上的特征解重构网格界面处的分布函数, 从而在一个数值时间步长尺度上耦合、累积和计算粒子输运和碰撞效应. 大量数值结果表明 DUGKS 具有较好的数值稳定性和较低的数值耗散, 其网格尺寸和时间步长不再受限于粒子平均自由程和弛豫时间, 能够自适应地高效模拟从弹道到扩散极限的多尺度粒子输运问题, 不局限于克努森数和马赫数. 在固体材料热传导领域, DUGKS 已经成功应用于声子、电子以及电声耦合热输运问题, 能够准确模拟不同材料种类、尺寸、温度或克努森数下的多尺度导热问题, 预言声子流体动力学新现象, 并应用于电子设备热管理.

DUGKS 虽然在多尺度粒子输运领域取得了成功, 但是尚有不足之处, 可以从以下 3 个方面作性能提升.

1) 多场耦合. 随着高性能芯片、宽域飞行器、精密制造、清洁能源等领域的发展^[2,3,16], 多场耦合在工程问题中难以避免, 例如电子设备热管理中涉及电声耦合产热-固体热应力-声子导热-气液相变传热^[1,3,8]、高超声速飞行器热防护需综合考虑气动热-烧蚀-辐射-热化学非平衡^[4,12-16]、低温等离子体刻蚀过程中涉及多种中性气体、电子或带电离子以及固体材料之间的物理化学反应^[2,21]等. 前期 DUGKS 主要针对单一粒子或两种粒子的多尺度输运问题, 亟须发展面向多粒子输运及耦合问题的动理学方法. 另一方面, 虽然原始 Boltzmann 输运方程要求系统特征长度远远大于粒子直径或相干长度, 但是通过修正外力项、源项或引入 Wigner 形式输运方程等手段, 能够发展面向复杂系统的动理学模型与 DUGKS 方法, 并与实验数据或微观模

拟结果作对比, 例如研究稠密流体流动^[151]或固体相干热输运^[152]等。

2) 工业软件集成. 过去 12 年 DUGKS 已被拓展至各种粒子输运领域, 集成到全球最大的 CFD 开源平台 OpenFOAM^[130], 被国内外团队采用并基于 C/C++ 进一步开发、优化或开源^[118,132–133], 并且 CPU/GPU 并行、隐格式加速、自适应/非结构网格等技能不断加持^[102,118,121,130,132,153]. 但是功能较为分散, 各种技能之间缺乏良好衔接与集成, 相比于 TCAD, COMSOL, ANSYS 等国际商业软件, DUGKS 在功能通用性、用户体验、大众普及性、成本与生态等方面存在欠缺. 例如 2021 年 Intel 团队详细介绍了 40 多年 TCAD 在物理模型、算法、计算规模等方面的发展^[1], 从埃米横跨到毫米, 涵盖求解薛定谔方程、泊松方程、非平衡格林函数、BTE、宏观漂移-扩散方程、Compact 模型等, 已成为 EDA 领域国际顶尖仿真软件. 因此如何将 DUGKS 各大技能融为一体, 集成到工业软件, 或许能进一步助其走向工程实战与国际市场。

3) 内存与维数灾难. 随着计算规模和问题复杂度的增加, 介观数值方法会面临严重的内存与维数灾难问题, 尤其是 DUGKS 等确定性方法, 例如在 C/C++ 编程中以双精度浮点型开辟一个 $60^3 \times 60^3$ 的分布函数数组大约需要 300 GB 计算机内存. 以 MC 为代表的粒子类方法^[4,60]和 AI^[56,154,155]虽然同样面临内存与维数灾难问题, 但相对而言较弱。

将 DUGKS 与粒子类方法相结合或许是解决内存与维数灾难问题的有效办法之一, 其中统一气体动理学波粒方法已成为一个成功案例^[68,156]. 该方法核心是采用分布函数的积分解析解和模拟粒子分别表征平衡态部分和非平衡部分. 一方面, 通过引入模拟粒子对动量空间进行充分采样, 从而降低内存需求和计算成本; 另一方面, 动理学方程和宏观守恒方程相互耦合, 实现多尺度粒子输运问题的高效模拟^[68,156]. 最近 Liu 等^[157]将该方法成功拓展至固体材料导热领域。

将传统数值计算方法与 AI 各自的优势相结合实现扬长避短, 或许能进一步提高计算效率, 解决内存和维数灾难问题^[56,154,155]. AI 虽然存在训练开销大、外推可靠性低、数值精度低等问题, 但是其高维非线性问题、反问题、数据驱动等领域已展现优势与潜能^[56,154,155,158], 并且预测速度快. 最近 Lin 等^[159]将 MC 与内嵌物理知识神经网络结合,

求解声子 RTA-BTE 模型. 该方法通过在时间、位置和动量空间随机抽样取点并采用深度神经网络逼近声子分布函数, 不仅能够描述微纳尺度导热现象, 而且极大地降低了计算机内存需求, 适合处理高维问题, 不存在统计噪声。

感谢袁瑞峰、岐亦铭、刘佩尧、宋新亮和卜家琦提供 DUGKS 模拟稀薄气体、湍流、低速渗流、辐射、等离子体的数据; 感谢 Samuel Huberman 团队提供第一性原理计算数据。

参考文献

- [1] Stettler M A, Cea S M, Hasan S, Jiang L, Keys P H, Landon C D, Marepalli P, Pantuso D, Weber C E 2021 *IEEE T. Electron Dev.* **68** 5350
- [2] Chen J F, Zhu L F 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 095201 (in Chinese) [陈锦峰, 朱林繁 2024 物理学报 **73** 095201]
- [3] Chinese Academy of Sciences 2022 *Chinese Discipline Development Strategy: Thermal Management of Electronic Devices* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [中国科学院 2022 中国学科发展战略: 电子设备热管理 (北京: 科学出版社)]
- [4] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows* (Oxford University Press)
- [5] Duan W H, Zhang G 2017 *Nanomaterial Thermal Conductivity Series on Theoretical Physics and Its Interdisciplinary Frontiers in the 21st Century* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [段文晖, 张刚 2017 纳米材料热传导. 21 世纪理论物理及其交叉学科前沿丛书 (北京: 科学出版社)]
- [6] Chen G 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 555
- [7] Chen J, Xu X, Zhou J, Li B 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 025002
- [8] Luo T L, Ding Y F, Wei B J, Tu J Y, Zhu G M, Li B W 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 234401 (in Chinese) [罗天麟, 丁亚飞, 韦宝杰, 杜建迎, 沈翔瀛, 朱桂妹, 李保文 2023 物理学报 **72** 234401]
- [9] Cao B Y 2023 *Non Fourier Thermal Conductivity of Nanostructured Materials* (Beijing: Science Press) (Beijing: Science Press) (in Chinese) [曹炳阳 2023 纳米结构的非傅里叶导热 (北京: 科学出版社)]
- [10] Tang Z L, Shen Y, Cao B Y 2025 *IEEE T. Electron Dev.* **72** 1907
- [11] Wu Z P, Zhang C, Hu S Q, Ma D K, Yang N 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 184401 (in Chinese) [吴志鹏, 张创, 胡世谦, 马登科, 杨诺 2023 物理学报 **72** 184401]
- [12] Zhao J, Sun X C, Zhang J, Tang Z G, Wen D S 2022 *Acta Aeron. Aston. Sin.* **43** 89 (in Chinese) [赵瑾, 孙向春, 张俊, 唐志共, 文东升 2022 航空学报 **43** 89]
- [13] Shen Q 2003 *Rarefied Gas Dynamics* (Beijing: National Defense Industry Press) (in Chinese) [沈青 2003 稀薄气体动力学 (北京: 国防工业出版社)]
- [14] Fan J 2013 *Adv. Mech.* **43** 185 (in Chinese) [樊菁 2013 力学进展 **43** 185]
- [15] Chen W F, Zhao W W 2017 *Thin Gas Dynamics Moment Method and Numerical Simulation* (Shanghai: Science Press) (in Chinese) [陈伟芳, 赵文文 2017 稀薄气体动力学矩方法及数值模拟 (上海: 科学出版社)]

- [16] Ji X H, Huang F, ZHANG J, Wang X D, Cheng X L, Shen Q 2024 *Acta Aeron. Astron. Sin.* **45** 30254 (in Chinese) [靳旭红, 黄飞, 张俊, 王学德, 程晓丽, 沈清 2024 *航空学报* **45** 30254]
- [17] Jin S 1999 *SIAM J Sci. Comput.* **21** 441
- [18] Xu K 2015 *Direct Modeling for Computational Fluid Dynamics: Construction and Application of Unified Gas-Kinetic Schemes* (Singapore: World Scientific)
- [19] Guo Z, Li J, Xu K 2023 *Phys. Rev. E* **107** 025301
- [20] Adams M L, Larsen E W 2002 *Prog. Nucl. Energ.* **40** 3
- [21] Guo W, Bai B, Sawin H H 2009 *J. Vac. Sci. Technol. A* **27** 388
- [22] Chen G 2005 *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (Oxford: Oxford University Press)
- [23] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [24] Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, et al. 2009 *J. Phys.-condens. Mat.* **21** 395502
- [25] Broido D A, Malorny M, Birner G, Mingo N, Stewart D A 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 231922
- [26] Kim H, Son D, Myeong I, Kang M, Jeon J, Shin H 2018 *IEEE T. Electron Dev.* **65** 4520
- [27] Zhang C, Lou Q, Liang H 2025 *Int. J. Heat Mass Transfer* **236** 126374
- [28] Joseph D D, Preziosi L 1989 *Rev. Mod. Phys.* **61** 41
- [29] Kovács R 2024 *Phys. Rep.* **1048** 1
- [30] Succi S, Karlin I V, Chen H 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 1203
- [31] Kaviani M 2008 *Heat transfer physics* (Cambridge University Press)
- [32] Kubo R T M, N H 1991 *Statistical Physics II Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Springer Series in Solid State Sciences (Springer, Berlin, Heidelberg)
- [33] Sydney Chapman C C T G Cowling 1995 *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction, and Diffusion in Gases* Cambridge Mathematical Library, (3rd Ed.) (Cambridge: Cambridge University Press)
- [34] Cheremisin F 1985 *USSR Comp. Math. Math. Phys.* **25** 156
- [35] Wu L, Zhang Y H, Li Z H 2017 *Sci. Sin. Phys. Mech. Astron.* **47** 070004 (in Chinese) [吴雷, 张勇豪, 李志辉 2017 *中国科学: 物理学 力学 天文学* **47** 070004]
- [36] Li W, Carrete J, Katcho N A, Mingo N 2014 *Comput. Phys. Commun.* **185** 1747
- [37] Guyer R A, Krumhansl J A 1966 *Phys. Rev.* **148** 766
- [38] Hardy R J, Albers D L 1974 *Phys. Rev. B* **10** 3546
- [39] Murthy J Y, Narumanchi S V J, Pascual-Gutierrez J A, Wang T, Ni C, Mathur S R 2005 *Int. J. Multiscale Computat. Eng.* **3** 5
- [40] Xu A G, Zhang Y D 2022 *Complex Media Dynamics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [许爱国, 张玉东 2022 *复杂介质动力学* (北京: 科学出版社)]
- [41] Callaway J 1959 *Phys. Rev.* **113** 1046
- [42] Zeng J N, Li Q, Wu L 2022 *Acta Aerodyn. Sin.* **40** 1 (in Chinese) [曾嘉楠, 李琪, 吴雷 2022 *空气动力学学报* **40** 1]
- [43] Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M 1954 *Phys. Rev.* **94** 511
- [44] Dimarco G, Pareschi L 2014 *Acta Numer.* **23** 369
- [45] Mazumder S 2022 *Annu. Rev. Heat Transfer* **24** 71
- [46] Struchtrup H 2006 *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows: Approximation Methods in Kinetic Theory*. Interaction of Mechanics and Mathematics (Berlin Heidelberg: Springer)
- [47] Guo Y, Wang M 2015 *Phys. Rep.* **595** 1
- [48] Hua Y C, Cao B Y, Guo Z Y 2015 *Chin. Sci. Bull.* **60** 2344 (in Chinese) [华钰超, 曹炳阳, 过增元 2015 *科学通报* **60** 2344]
- [49] Sendra L, Beardo A, Torres P, Bafaluy J, Alvarez F X, Camacho J 2021 *Phys. Rev. B* **103** L140301
- [50] Burnett D 1936 *P. Lond. Math. Soc.* **s2-40** 382
- [51] Cattaneo C 1948 *Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena* **3** 83
- [52] Grad H 1949 *Commun. Pur. Appl. Math.* **2** 331
- [53] Guyer R A, Krumhansl J A 1966 *Phys. Rev.* **148** 778
- [54] Struchtrup H, Torrilhon M 2003 *Phys. Fluids* **15** 2668
- [55] Wu L, Gu X J 2020 *Adva. Aerodyn.* **2** 2
- [56] Weinan E, Han J Q, Zhang L F 2021 *Phys. Today* **74** 36
- [57] Han J F, Ma C, Ma Z, Weinan E 2019 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **116** 21983
- [58] Zhao J, Zhao W, Ma Z, Yong W A, Dong B 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **185** 122396
- [59] Chen L, Zhang C, Zhao J 2024 *Phys. Rev. E* **110** 025303
- [60] Bird G A 1963 *Phys. Fluids* **6** 1518
- [61] Klitsner T, VanCleve J E, Fischer H E, Pohl R O 1988 *Phys. Rev. B* **38** 7576
- [62] Peterson R B 1994 *J. of Heat Transfer* **116** 815
- [63] Mazumder S, Majumdar A 2001 *J. Heat Transfer* **123** 749
- [64] Péraud J P M, Landon C D, Hadjiconstantinou N G 2014 *Annu. Rev. Heat Transfer* **17** 205
- [65] Shen Y, Yang H A, Cao B Y 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **211** 124284
- [66] Wollaber A B 2016 *J. Comput. Theor. Trans.* **45** 1
- [67] Pareschi L, and G R 2000 *Transp. Theory Stat. Phys.* **29** 415
- [68] Liu C, Zhu Y, Xu K 2020 *J. Comput. Phys.* **401** 108977
- [69] Fei F, Zhang J, Li J, Liu Z 2020 *J. Comput. Phys.* **400** 108972
- [70] Baker L L, Hadjiconstantinou N G 2005 *Phys. Fluids* **17** 051703
- [71] Péraud J P M, Hadjiconstantinou N G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 205331
- [72] Carrete J, Vermeersch B, Katre A, [van Roekeghem] A, Wang T, Madsen G K, Mingo N 2017 *Comput. Phys. Commun.* **220** 351
- [73] Pathak A, Pawnday A, Roy A P, Aref A J, Dargush G F, Bansal D 2021 *Comput. Phys. Commun.* **265** 108003
- [74] Yang R, Chen G, Laroche M, Taur Y 2005 *J. Heat Transfer* **127** 298
- [75] Shu C, Yang L M, Wang Y, Wu J 2022 *J. Nanjing Univ. Aeron. Astron.* **54** 801 (in Chinese) [舒昌, 杨鲤铭, 王岩, 吴杰 2022 *南京航空航天大学学报* **54** 801]
- [76] Guo Z, Xu K 2021 *Adva. Aerodyn.* **3** 6
- [77] Romano G 2021 arXiv: 2106.02764
- [78] Chen S, Chen H, Martinez D, Matthaeus W 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3776
- [79] Qian Y H, d'Humières D, Lallemand P 1992 *EPL* **17** 479
- [80] Chen H, Chen S, Matthaeus W H 1992 *Phys. Rev. A* **45** R5339
- [81] Mittal A, Mazumder S 2011 *J. Comput. Phys.* **230** 6977
- [82] Loy J M, Murthy J Y, Singh D 2012 *J. Heat Transfer* **135** 011008
- [83] Hao Q, Zhao H, Xiao Y 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 204501
- [84] Hua Y C, Shen Y, Tang Z L, Tang D S, Ran X, Cao B Y 2023 *Adv. Heat Transf.* **56** 355
- [85] Xu K, Huang J C 2010 *J. Comput. Phys.* **229** 7747
- [86] Liu C, Xu K 2020 *Acta Aerodyn. Sin.* **38** 197 (in Chinese) [刘畅, 徐昆 2020 *空气动力学学报* **38** 197]
- [87] Kopp H J 1963 *Nucl. Sci. Eng.* **17** 65
- [88] Alcouffe R E 1977 *Nucl. Sci. Eng.* **64** 344
- [89] Zhang C, Guo Z, Chen S 2017 *Phys. Rev. E* **96** 063311
- [90] Frisch U, Hasslacher B, Pomeau Y 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 1505

- [91] Guo Z, Shu C 2013 *Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering* (Vol. 3) (Singapore: World Scientific)
- [92] Succi S 2001 *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond* (Oxford: Oxford University Press)
- [93] Ali S A, Kollu G, Mazumder S, Sadayappan P, Mittal A 2014 *Int. J. Therm. Sci.* **86** 341
- [94] Lathrop K D 1968 *Nucl. Sci. Eng.* **32** 357
- [95] Chai J C, Lee H S, Patankar S V 1993 *Numer. Heat Transf. Part B* **24** 373
- [96] Guo Z L, Xu K, Wang R J 2013 *Phys. Rev. E* **88** 033305
- [97] Guo Z L, Wang R J, Xu K 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033313
- [98] Guo Z L, Xu K 2016 *Int. J. Heat Mass Transfer* **102** 944
- [99] Lian M, Zhang C, Guo Z L, Lü J T 2024 *Phys. Rev. E* **109** 065310
- [100] Song X L, Zhang C, Zhou X F, Guo Z L 2020 *Adva. Aerodyn.* **2** 3
- [101] Liu H, Quan L, Chen Q, Zhou S, Cao Y 2020 *Phys. Rev. E* **101** 043307
- [102] Yuan R F, Zhong C 2020 *Comput. Phys. Commun.* **247** 106972
- [103] Yuan R F, Liu S, Zhong C W 2021 *Commun. Nonlinear Sci.* **92** 105470
- [104] Zhang C, Wu L 2022 *Phys. Rev. E* **106** 014111
- [105] Zhang C, Xin Z Y, Lou Q, Liang H 2025 *Appl. Therm. Eng.* **271** 126293
- [106] Liu P Y, Wang P, Jv L, Guo Z L 2021 *Commun. Comput. Phys.* **29** 265
- [107] Qi Y, Chen T, Wang L P, Guo Z L, Chen S Y 2022 *Phys. Fluids* **34** 116101
- [108] Liu W E, Feng Y D, Li R L, Bai C H, Niu B F 2024 *Comput. Phys. Commun.* **299** 109157
- [109] Harter J R, Hosseini S A, Palmer T S, Greaney P A 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **144** 118595
- [110] Fiveland V A, Jessee J P 1996 *J. Thermophys. Heat Transfer* **10** 445
- [111] Loy S R M, James M, Murthy J Y 2015 *J. Heat Transfer* **137** 012402
- [112] Randrianalisoa J, Baillis D 2008 *J. Heat Transfer* **130** 072404
- [113] Ran X, Wang M R 2022 *J. Heat Transf.* **144** 082502
- [114] Mieussens L 2000 *Math. Models Methods Appl. Sci.* **10** 1121
- [115] Chacón L, Chen G, Knoll D A, Newman C, Park H, Taitano W, Willert J A, Womeldorff G 2017 *J. Comput. Phys.* **330** 21
- [116] Zhu Y J, Zhong C W, Xu K 2016 *J. Comput. Phys.* **315** 16
- [117] Su W, Wang P, Liu H H, Wu L 2019 *J. Comput. Phys.* **378** 573
- [118] Zhang R, Liu S, Chen J, Zhuo C, Zhong C 2024 *Phys. Fluids* **36** 016114
- [119] Zhang C, Guo Z, Chen S 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **130** 1366
- [120] Zhang C, Chen S Z, Guo Z L, Wu L 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **174** 121308
- [121] Zhang C, Huberman S, Song X L, Zhao J, Chen S Z, Wu L 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **217** 124715
- [122] Hu Y, Shen Y S, Bao H 2024 *Fundam. Res.* **4** 907
- [123] Hu Y, Jia R, Xu J X, Sheng Y F, Wen M H, Lin J, Shen Y X, Bao H 2024 *J. Phys-condens. Mat.* **36** 025901
- [124] Succi S 2015 *EPL* **109** 50001
- [125] Jeong J, Li X, Lee S, Shi L, Wang Y G 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 085901
- [126] Huberman S C 2018 *Ph. D. Dissertation* (Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology)
- [127] Huberman S, Duncan R A, Chen K, et al. 2019 *Science* **364** 375
- [128] Hao Q, Chen G, Jeng M S 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 114321
- [129] Zhang C, Guo Z L 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **134** 1127
- [130] Zhu L H, Chen S Z, Guo Z L 2017 *Comput. Phys. Commun.* **213** 155
- [131] Zhang Q, Wang Y L, Pan D H, Chen J F, Liu S, Zhuo C S, Zhong C W 2022 *Comput. Phys. Commun.* **278** 108410
- [132] Karzhaubayev K, Wang L P, Zhakebayev D 2024 *Comput. Phys. Commun.* **301** 109216
- [133] Zhang F F, Wang Y L, Zhang R, Guo J, Zhao T H, Liu S, Zhuo C S, Zhong C W 2025 *Adv. Eng. Softw.* **201** 103840
- [134] Luo X P, Yi H L 2017 *Int. J. Heat Mass Transfer* **114** 970
- [135] Huberman S, Zhang C, Haibeh J A 2022 arXiv: 2206.02769
- [136] Luo X P, Guo Y Y, Wang M R, Yi H L 2019 *Phys. Rev. B* **100** 155401
- [137] Zhang C, Guo R L, Lian M, Shiomi J 2024 *Appl. Therm. Eng.* **249** 123379
- [138] Lee S, Broido D, Esfarjani K, Chen G 2015 *Nat. Commun.* **6** 6290
- [139] Cepellotti A, Fugallo G, Paulatto L, Lazzeri M, Mauri F, Marzari N 2015 *Nat. Commun.* **6** 6400
- [140] Machida Y, Martelli V, Jaoui A, Fauqué B, Behnia K 2024 *Low Temp. Phys.* **50** 574
- [141] Zhang C, Chen S Z, Guo Z L 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **176** 121282
- [142] Zhang C, Wu L 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 032201
- [143] Tur-Prats J, Gutiérrez-Pérez M, Bafaluy J, Camacho J, Alvarez F X, Beardo A 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **226** 125464
- [144] Shang M Y, Zhang C, Guo Z L, Lü J T 2020 *Sci. Rep.* **10** 8272
- [145] Guo Y, Zhang Z, Nomura M, Volz S, Wang M 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **169** 120981
- [146] Raya-Moreno M, Carrete J, Carroixà X 2022 *Phys. Rev. B* **106** 014308
- [147] Liu C J, Wang Y Q, Yang Y, Duan Z W 2016 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **59** 684711
- [148] Sýkora M, Pavelka M, Restuccia L, Jou D 2023 *Phys. Scr.* **98** 105234
- [149] Zhang C, Guo Z L 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **181** 121847
- [150] Qian X, Zhang C, Liu T H, Yang R 2025 *Phys. Rev. B* **111** 035406
- [151] Shan B, Wang P, Zhang Y, Guo Z L 2020 *Phys. Rev. E* **101** 043303
- [152] Simoncelli M, Marzari N, Mauri F 2022 *Phys. Rev. X* **12** 041011
- [153] Zhang Y, Zhang C, Xinliang S, Zhaoli G 2025 *Commun. Comput. Phys.* **37** 383
- [154] Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, Perdikaris P, Wang S, Yang L 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 422
- [155] Weinan E 2021 *Not. Am. Math. Soc.* **68** 565
- [156] Liu S, Xu K, Zhong C 2022 *Acta Mech. Sin.* **38** 122123
- [157] Liu H, Yang X, Zhang C, Ji X, Xu K 2025 arXiv: 2505.09297
- [158] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G 2019 *J. Comput. Phys.* **378** 686
- [159] Lin Q, Zhang C, Meng X, Guo Z L 2024 arXiv: 2505.09297

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

**Discrete unified gas kinetic scheme and its application
in multi-scale heat conduction***ZHANG Chuang¹⁾ GUO Zhaoli^{2)†}¹⁾ (*Institute of Energy, School of Sciences, Hangzhou Dianzi University, Hangzhou 310018, China*)²⁾ (*Institute of Interdisciplinary Research for Mathematics and Applied Science, School of Mathematics and Statistics,
Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China*)

(Received 28 May 2025; revised manuscript received 9 June 2025)

Abstract

Multiscale particle transport problems are universally existent in the fields of precision manufacturing, nanomaterials, energy and power, national defense and military. Such issues involve large-scale length and time scales, posing great challenges to physical modeling and numerical simulation. In order to study multiscale particle transport problems, cross-scale numerical simulation based on the Boltzmann transport equation has become an effective method. However the nonlinear, multi-scale, and high-dimensional characteristics of the equation pose significant challenges to the stability, compatibility, computational efficiency/accuracy, and asymptotic preserving property of numerical methods. In recent years, many multiscale kinetic methods applicable to any Knudsen numbers have been developed, and one of them is the discrete unified gas kinetic scheme. Unlike the traditional direct numerical interpolation scheme, the discrete unified gas kinetic scheme reconstructs the distribution function at the cell interface through the characteristic solution of the kinetic equation in both time and position space, thereby coupling, accumulating, and calculating particle transport and collision effects on a numerical time step scale. Based on the idea of incorporating the evolution of physical equations into the construction process of numerical methods, the cell size and time step of this method are no longer limited by the mean free path and relaxation time of particles, therefore, the multiscale particle transport problems from the ballistic to diffusive limit can be adaptively and efficiently simulated. A large number of numerical results show that the present scheme has good numerical stability and low numerical dissipation, and it is not limited by the Knudsen number or Mach number. Based on the framework of the finite volume method, this method has been successfully applied to micro/nano scale fluid flow and heat transfer, hypersonic aircraft flows, solid-material thermal conduction, radiation, plasma, and turbulence. This paper mainly reviews the method and discusses its future prospects in the field of multi-scale heat conduction in solid materials, including applications in phonon transport, electron-phonon coupling, phonon hydrodynamic heat conduction, and thermal management of electronic equipment.

Keywords: multiscale particle transport, Boltzmann transport equation, mesoscopic numerical methods, discrete unified gas kinetic scheme, heat conduction

PACS: 47.11.St, 05.20.Dd, 44.10.+i, 63.20.-e**DOI:** [10.7498/aps.74.20250694](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250694)**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250694](https://cstr.net.cn/detail/32037.14.aps.74.20250694)

* Project supported by the Interdisciplinary Research Support Program of Huazhong University of Science and Technology, China (Grant No. 2023JCXYJ002).

† Corresponding author. E-mail: zlguo@hust.edu.cn

离散统一气体动理学格式及其多尺度导热应用

张创 郭照立

Discrete unified gas kinetic scheme and its application in multi-scale heat conduction

ZHANG Chuang GUO Zhaoli

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 174702 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250694

CSTR: 32037.14.aps.74.20250694

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250694>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

变温壁驱动腔内热蠕流特性的离散统一气体动理学格式模拟

Discrete unified gas kinetic simulation of characteristics of variable temperature wall driven thermal creep flow in cavity

物理学报. 2025, 74(4): 044702 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241334>

耦合Frenkel-Kontorova双链的格波解及其色散关系

Lattice wave solution and its dispersion relation of two coupled Frenkel-Kontorova chains

物理学报. 2022, 71(15): 154401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212362>

碳纳米管和碳化硅纳米管热导率的分子动力学研究

Molecular dynamics study of thermal conductivity of carbon nanotubes and silicon carbide nanotubes

物理学报. 2022, 71(3): 030202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210969>

基于离子阱中离子晶体的热传导的研究进展

Research progress of heat transport in trapped-ion crystals

物理学报. 2024, 73(3): 033701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231719>

等离子体中激光能量沉积系数、电子热传导系数和电阻率的统一推导

Unified derivation of laser energy deposition coefficient, electron thermal conduction coefficient and resistivity in plasma

物理学报. 2025, 74(12): 125201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250340>

离散Boltzmann方程的求解: 基于有限体积法

Solution of the discrete Boltzmann equation: Based on the finite volume method

物理学报. 2024, 73(11): 110504 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231984>